

# AI大模型结晶预测 赋能科研与产业创新

面向药物与晶态材料研发的智能化预测解决方案



# 目录

CONTENTS



01 | 项目介绍及说明

04 | 商务模式

02 | 团队成员及介绍

05 | 风险与对策

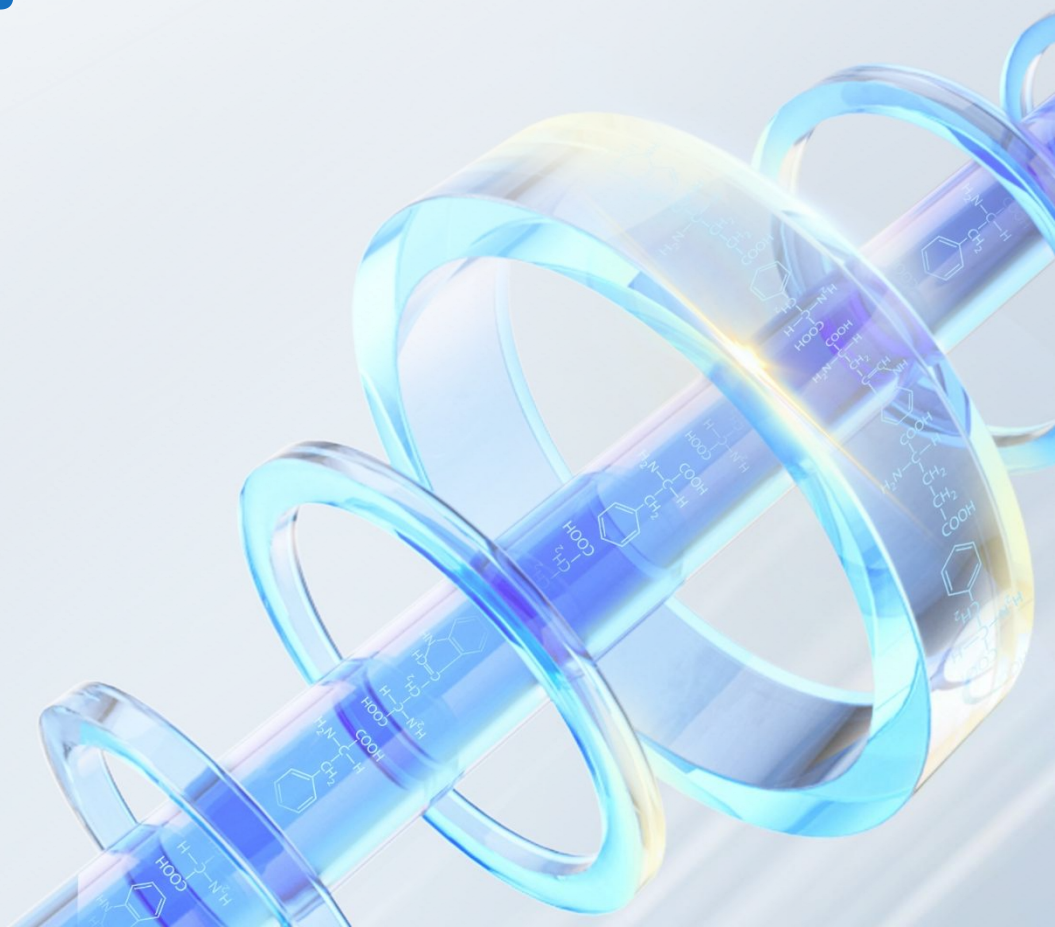
03 | 市场整体概况

06 | 企业愿景



# 01 项目介绍及说明

COMPANY OVERVIEW





团队名称：诺晶AI结晶预测

核心业务：基于AI的晶体结构预测平台，服务 药物研发、材料研发企业和科研机构

当前阶段：已完成算法核心研发，正对接医药CRO试点。

## 技术亮点

自研高通量晶体预测模型，融合图神经网络与物理驱动机制

单次预测显著减少实验筛选成本 (>80%)

具备广泛适配性，可覆盖药物晶型、无机材料、金属有机骨架等

## 企业愿景

CORPORATE VISION

始终登高望远，解决全球科研应用实际发展难题



- 晶体结构是物质物理与化学性能的核心决定因素，广泛应用于材料科学、药物研发、生物学等领域。晶体结构不同会显著影响药物溶解度、稳定性、活性等关键性能
- 目前药企和医药CRO公司（如晶云科技）在晶型筛选上都是依靠经验和大量实验来筛选，也会借助传统晶体预测方法（全局结构搜索+DFT）来减少实验成本，有一些企业（如晶泰科技）会进行优化结构搜索算法，训练专有分子力场，来提高预测精度



- 我们构建**端到端的AI大模型**来代替传统晶体结构预测（DFT+结构搜索），基于海量晶体结构与能量数据，实现秒级预测，精度更接近真实可实验数据，效率提升百倍以上。该技术路线类比AlphaFold在蛋白质结构预测中的突破，未来可快速扩展到材料、农药科学等领域

传统CSP方法	VS	端到端大模型方法
物理驱动（量子力学+结构搜索）	原理基础	数据驱动+物理协同（端到端大模型）
高（但依赖所用泛函、收敛参数）	预测精度	更高（更接近真实可实验数据）
计算量大，耗时长（数小时~数天）	计算耗时	更快（预测模型几秒出结果）
依赖进化算法/随机算法反复优化，效率低、易陷入局部极小值	结构搜索能力	可一次性生成或快速排序大量结构
受限于所建模型体系	通用性	更灵活，可快速扩展到其他化学体系和晶体类型

总结：更快、更准、更灵活

## • WHY NOW ? •



### 数据 DATA

- 大量晶体数据已积累
- CCDC, ICSD等数据库已收录百万级数据



### 技术 TECHNOLOGY

- 大模型+图神经网络技术成熟
- AlphaFold蛋白质结构预测的成功证明路径可行
- GNN/Transformer能泛化结构信息



### 市场 MARKET

- 材料/药物研发需更高效率与更低成本
- DFT计算瓶颈日益凸显

端到端AI大模型晶体结构预测  
正是在此刻成为可能



## 产品形态

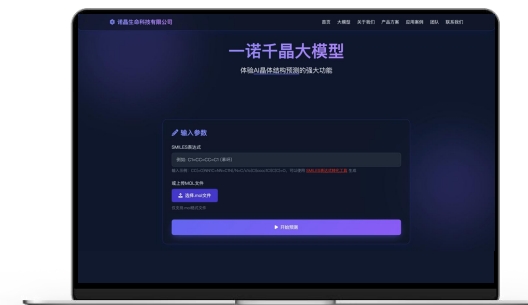
- 基于Web的预测平台 + API + 私有化部署方案

## 核心功能

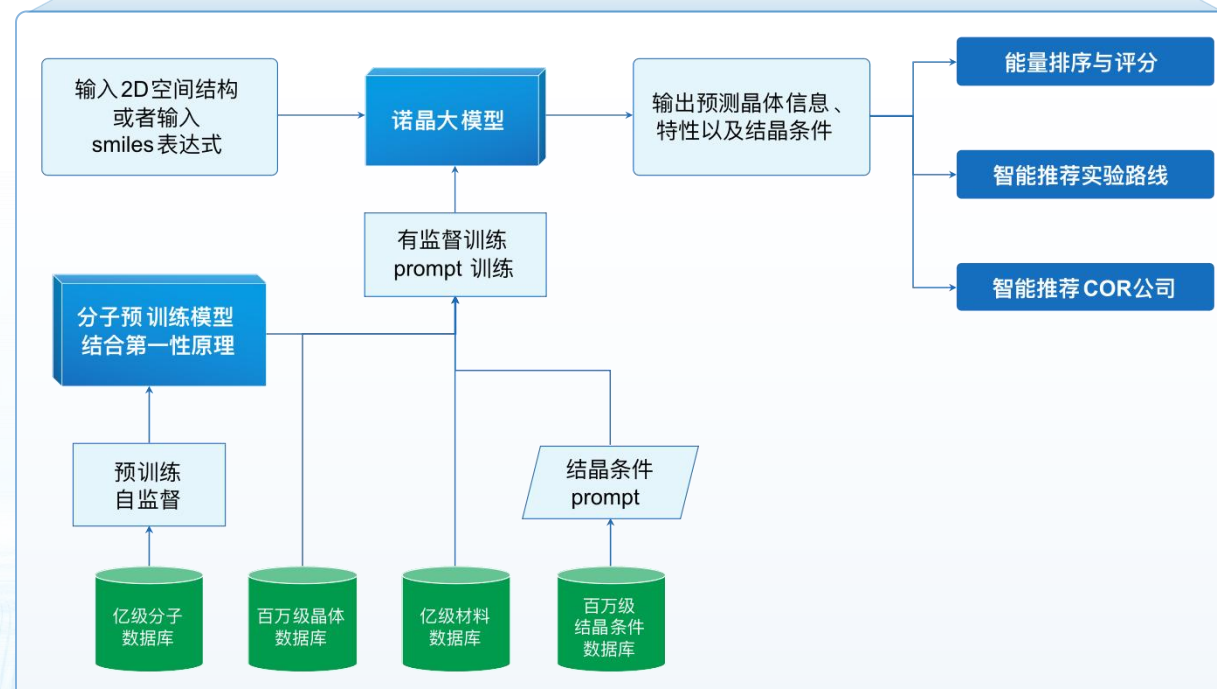
- 晶型预测：输入分子结构，自动预测稳定构型
- 能量排序与评分：展示预测结构的稳定性
- 晶型筛选建议：智能推荐实验路线

## 系统架构

- 前端：交互式分子上传与结果展示界面
- 中台：高效调度系统支持并行计算
- 后端：自研算法引擎 + HPC并行框架

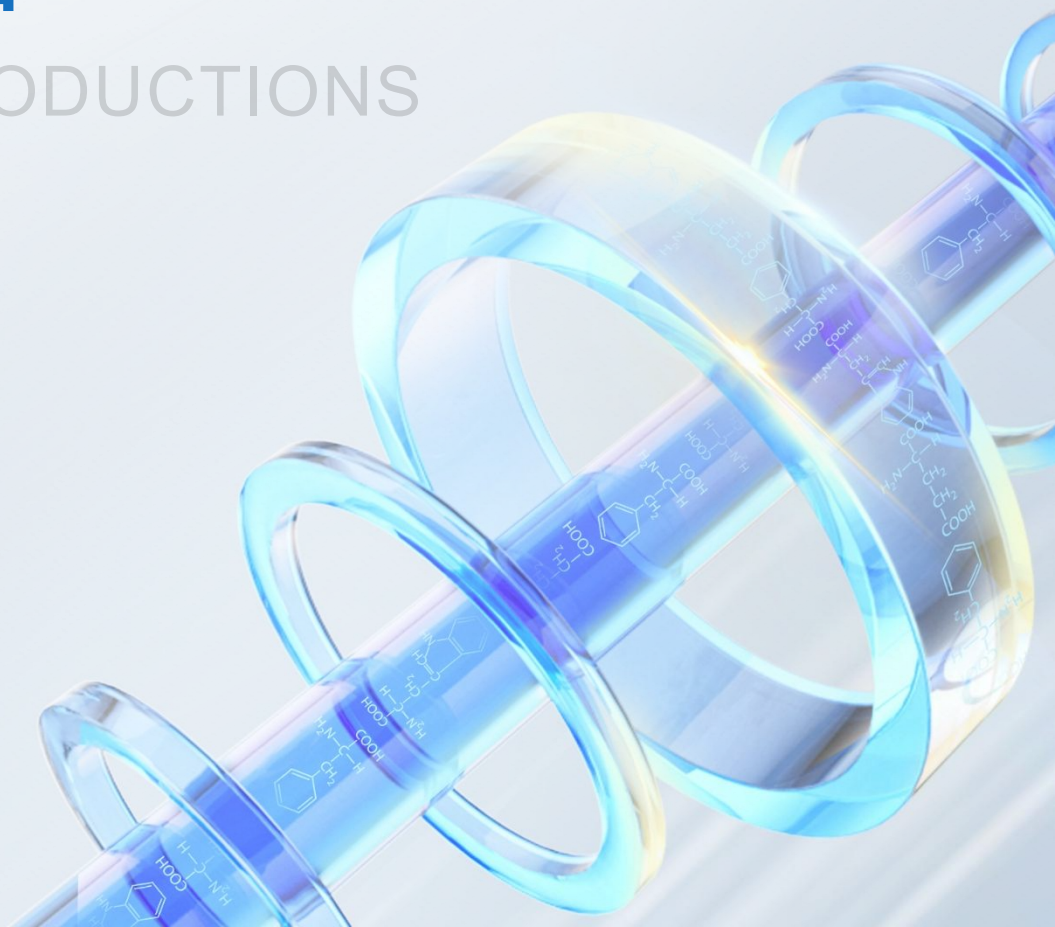


产品访问地址：<http://www.noginai.com>



# 02 团队成员及介绍

TEAM MEMBERS AND INTRODUCTIONS





黄其柏  
创始人

## 主要负责从0到1构建产品和团队

- 连续创业者，曾在字节跳动、小米任技术专家
- 具备丰富的AI与产品落地经验，创办AI+社交平台「微校时光」，专注校园社交与本地服务
- 创办酒店智能运营平台「房满盈」，推动中小型酒店数字化转型
- 主要负责从0到1构建产品和团队，擅长技术融合创新与复杂系统架构设计，推动产品落地与业务快速增长



黄懿  
联合创始人

## 主要负责公司市场商务战略及执行

- 湘江新区工商联执委，共青团湖南省委青年企业家，团中央国际交流人才成员，江西青年企业家理事
- 深耕晶体行业多年，主要负责公司市场营销战略
- 洞察市场趋势与客户需求，精准定位产品并推动市场推广，助力销售目标实现



何清  
首席科学家

## 主要研究方向为超分子化学及垂直大模型算法

- 湖南大学教授、博士生导师，国家海外高层次青年人才，德克萨斯大学奥斯汀分校博士后（合作导师为Jonathan L. Sessler教授）
- 主要研究方向为超分子化学，包括新型非共价相互作用力、超分子结晶学和超分子分离技术
- 主持多项国家自然科学基金与重点研发项目，荣获2025年度“Thieme Chemistry Journals Award”、“The Sessler Early Career Researcher Prize”国际学术奖



朱黄天之  
CTO

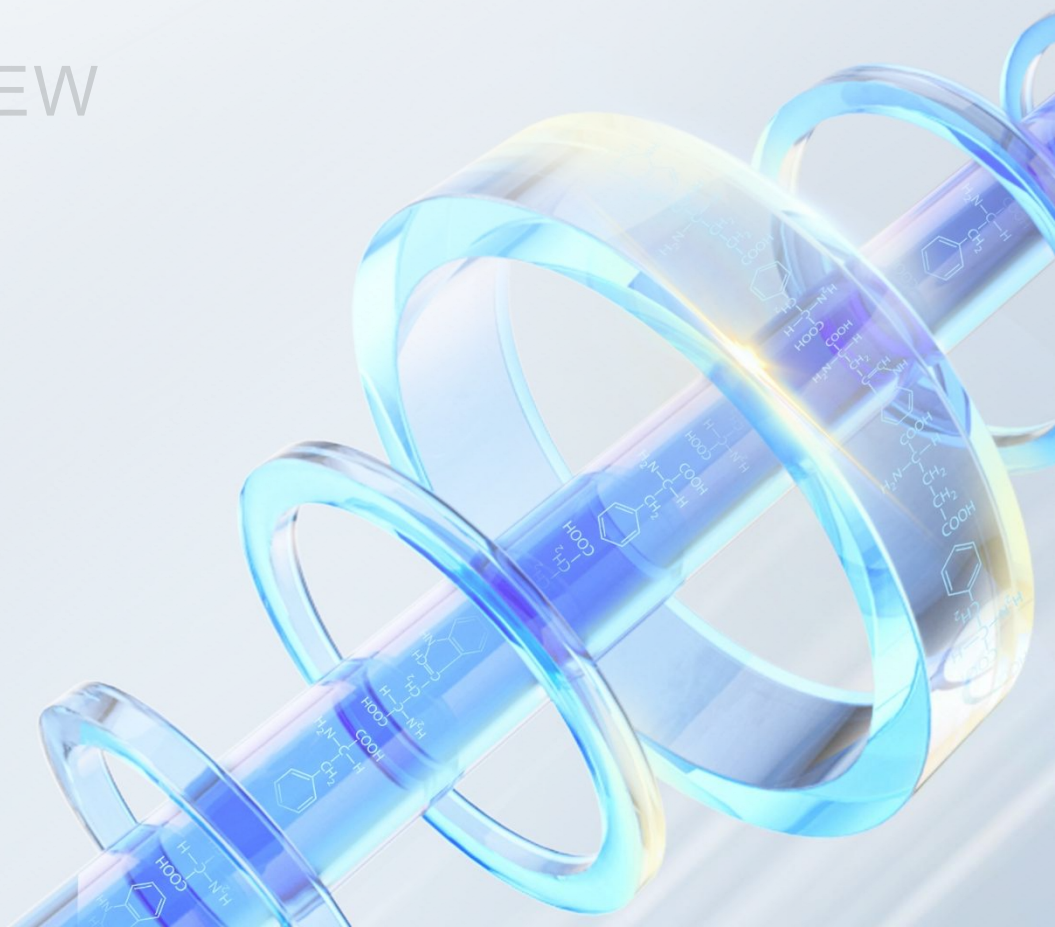
## 负责小分子晶体学和晶体学算法的技术支持工作

- 英国剑桥大学Research Associate
- 从事于晶体研究，以第一作者发表论文17篇，以通讯作者发表论文14篇，H因子31
- 三次获得浙江省化学会创新奖，荣获京博科技奖
- 主导公司战略方向、核心技术路线及团队建设，致力于将前沿科研成果转化为服务新药研发、材料设计等领域的核心生产力



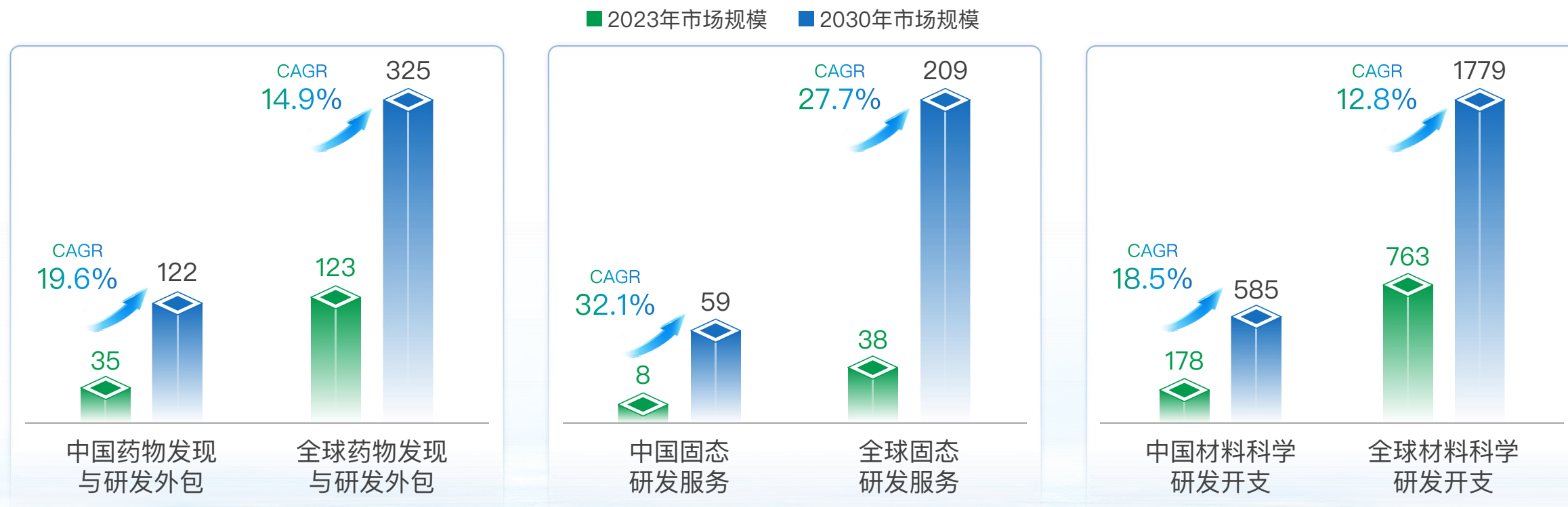
# 03 市场整体概况

OVERALL MARKET OVERVIEW



- 根据弗若斯特沙利文的数据统计，**晶体结构预测**作为新药研发与材料设计中的核心底层技术，正伴随全球固态与材料科学投入快速增长，市场潜力巨大，尤其在中国具备巨大成长空间

## 晶体结构预测所依托市场规模对比（2023-2030）



晶体结构预测在药物、材料、农药等核心领域的整体市场规模，**预计在10亿美金左右**，并伴随AI 技术发展呈快速增长趋势



## ► AI for Science: 我们通向千亿美金市场的星辰大海

### 全球AI for Science市场规模测算（亿美元）

	市场规模 (2025E)	研发支出 占比	AI渗透率 1%	AI渗透率 2.5%	AI渗透率 10%	AI渗透率 25%
化工	58,182	3.86%	22	56	225	561
医药	16,232	7.77%	13	32	126	315
新能源	23,310	4.82%	11	28	112	281
半导体	7,189	15.18%	11	27	109	273
合金	3,349	2.53%	1	2	8	21
显示	1,955	7.20%	1	4	14	35
合计市场规模（亿美元）			59	149	595	1,486

资料来源: cefic, wind, 德斯, 艾美达医药咨询, BloombergNEF, the business research company, precedence research, 金融界, wind, 国盛证券研究所

结果表明，在渗透率达到2.5%时，AI4S (AI for Science) 行业的规模约149亿美元（近千亿人民币），若未来该比重提升至25%，则AI4S将成长为年产值突破1400亿美元（近万亿人民币）的庞大蓝海



## 精准切入高价值需求，构建AI科研平台入口



以CSP为切入点，技术壁垒明确、验证路径清晰



中长期将延展至AI for Science 更广泛科研建模场景



正在构建一个连接科研问题与AI解法的智能平台型产品

**AI for Science**  
(千亿美金市场)

**AI制药/材料预测**  
(百亿美金市场)

**晶体结构预测**  
(十亿美金，  
当前落地市场)

公司	技术路线	盈利模式	关系
XtalPi（晶泰科技）	全局结构搜索+物理建模	项目制（20w-80w）	直接竞争
Schrödinger	分子模拟	SaaS订阅+咨询	直接竞争
诺晶生命（我们）	AI+物理协同预测	SaaS订阅+私有部署	-

## 我们的优势

### 端到端 一体化大模型

不再依赖结构搜索  
+优化流程，极简  
预测路径

### 更贴近 真实数据训练

基于可实验结构  
与能量，提升结构  
可合成性

### 模型 推理效率高

支持批量、秒级  
结构预测，适配  
工业应用场景

### 泛化 能力强

一次训练可适配  
多种材料类型，  
具备迁移扩展能力

### 平台化 产品定位

面向科研与  
企业的结构智能  
服务平台

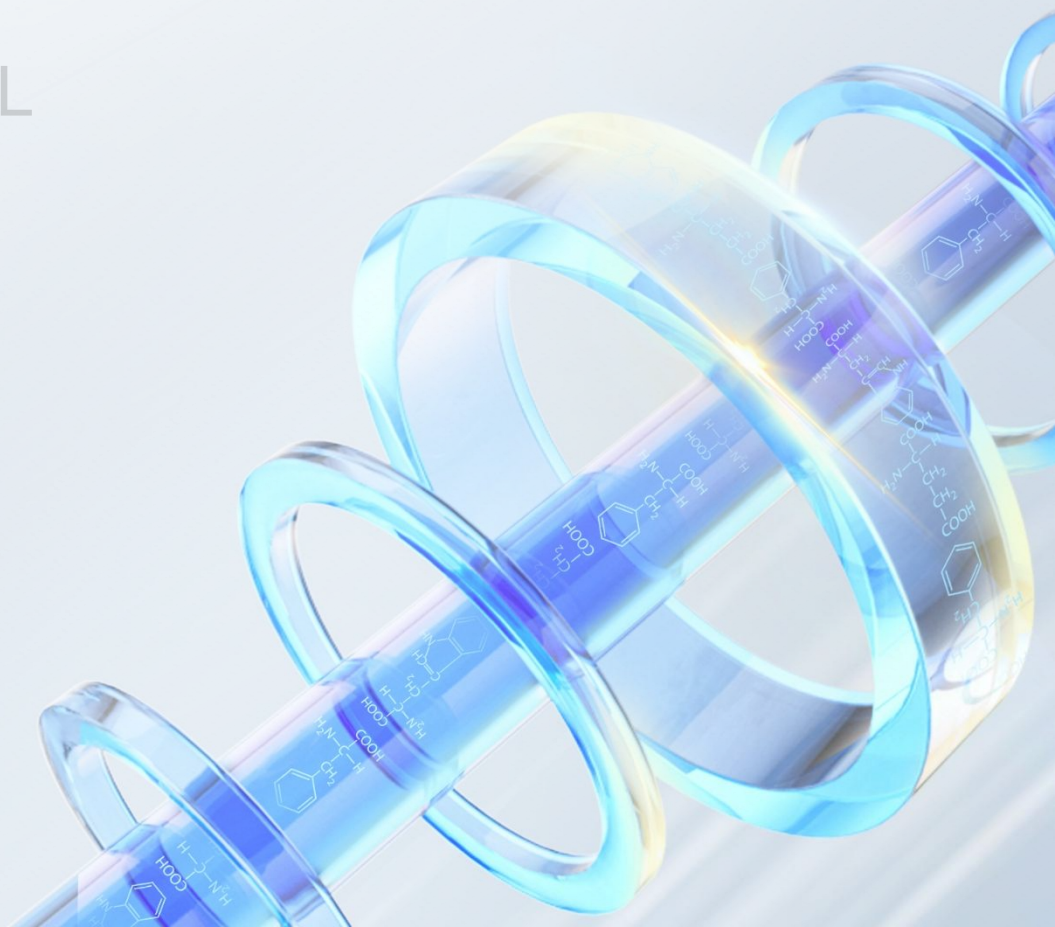
构建闭环体系：数据获取→AI预测→实验验证→模型迭代





# 04 项目商业模式

PROJECT BUSINESS MODEL





## 医药CRO公司/高校科研组

### 解决客户实际需求

提供晶体培养实验目标  
辅助决策

提供晶体培养方案  
辅助快速验证



## 大型药企 (新药研发/仿制药研发)

### 解决客户实际需求

辅助通过FDA (Food and Drug  
Administration) 认证

专利保护  
发现新晶体, 协助专利保护

绕过专利保护  
发现新晶体, 绕过专利保护



## 服务费用

### 企业授权

- 年费30万 (30万CSP Token , 预计5个预测项目)
- 年费50万 (50万CSP Token, 预计8-10个预测项目)
- 年费80万 (80万CSP Token , 预计10-15个预测项目)
- 多维数据库调用 授权50w/年



## 服务流程

### 商务

了解企业需求、协同  
部门、合同、跟进项目



### 技术

提供方案、解决问题



### 商务

中间穿插技术落地会议



### 验证

稳定结构、结晶过程



### 交付 报告



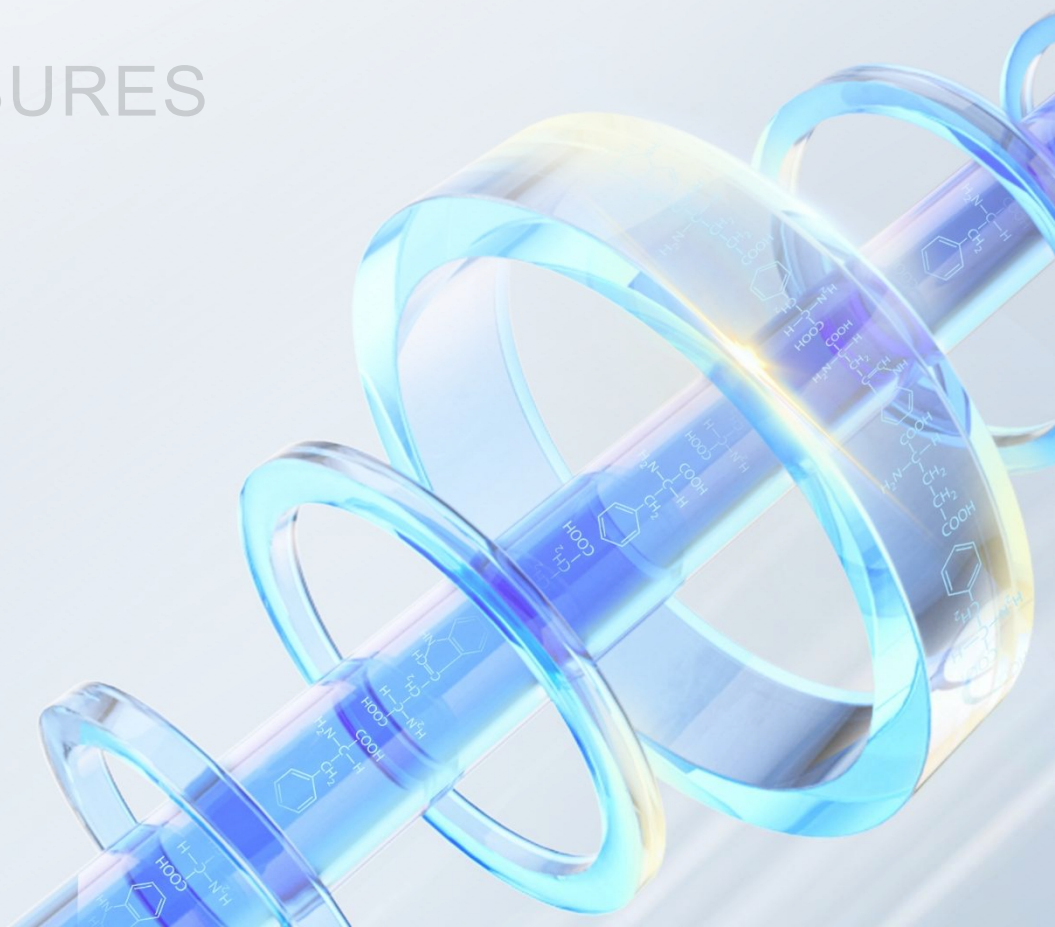
• 目前初始服务阶段，部分企业和高校研究团队使用 •

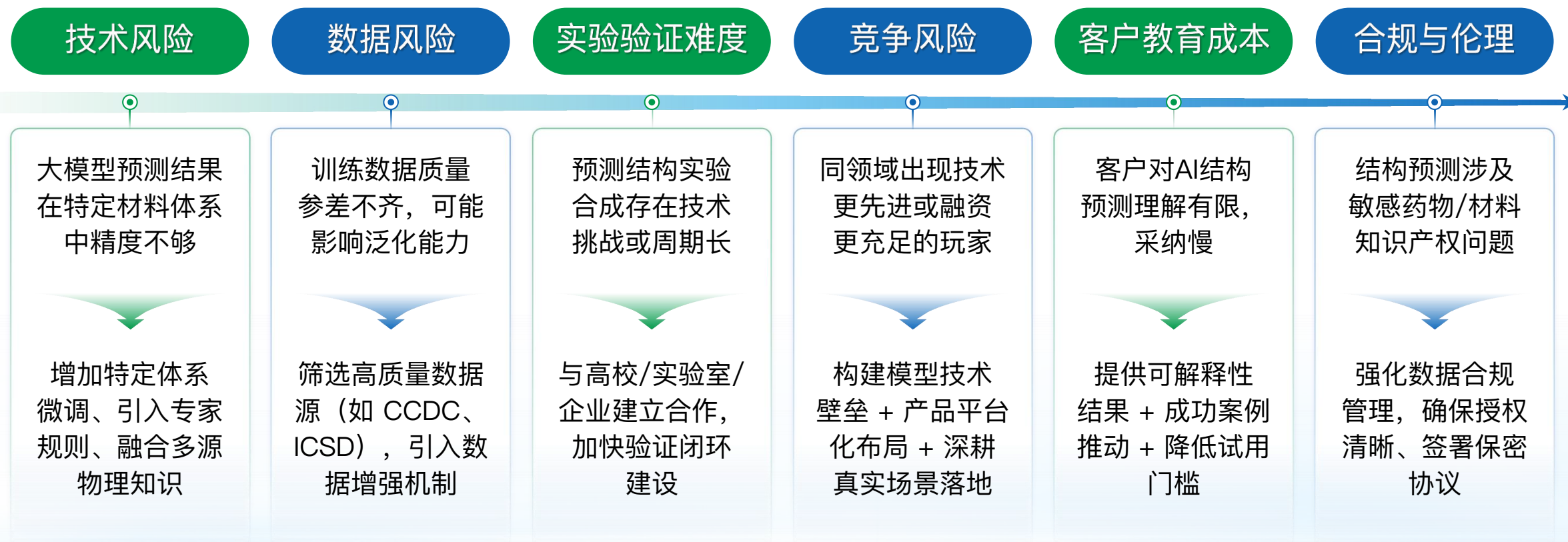
福兴 FORXINE



# 05 风险与对策

RISKS AND COUNTERMEASURES





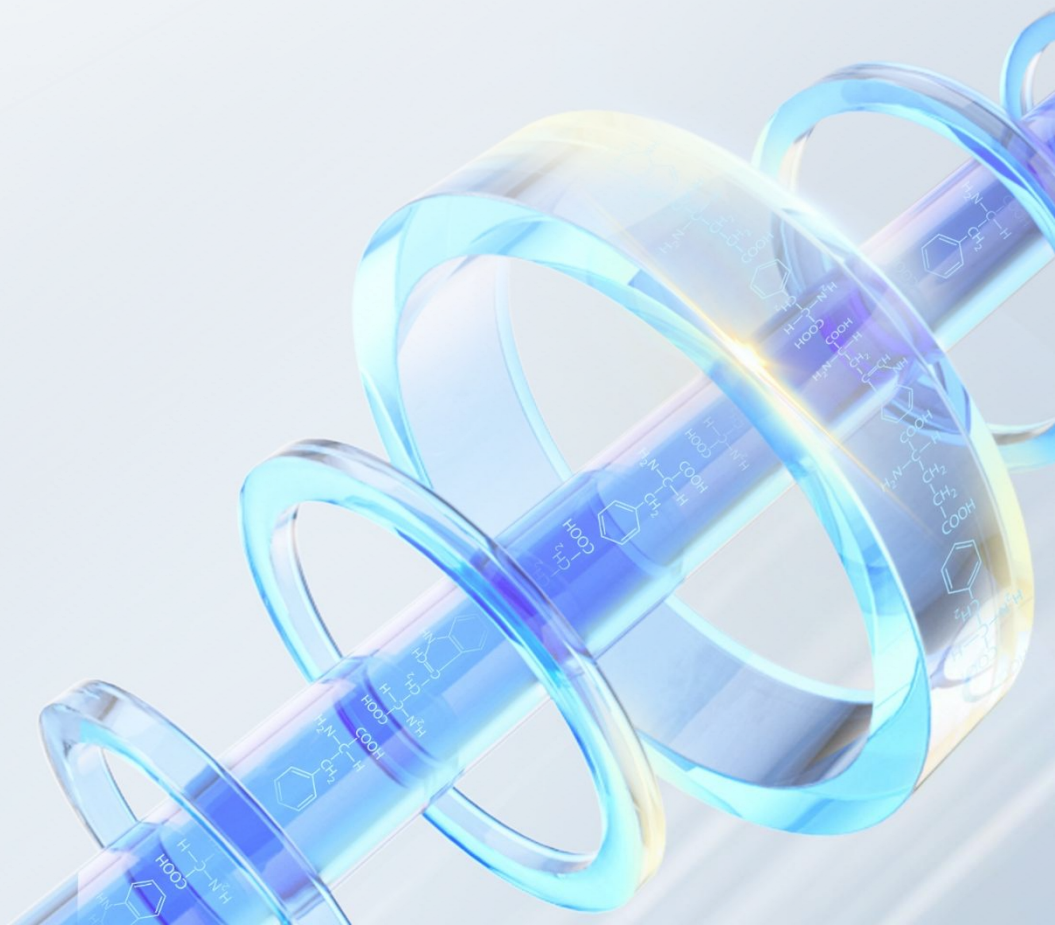
风险不可避免，但我们已构建系统性应对机制，技术上加强闭环与鲁棒性，商业上推进真实验证和场景落地，确保产品长期可持续发展



# 06

# 企业愿景

CORPORATE VISION



## 愿景 CORPORATE VISION 始终登高望远，解决全球科研应用实际发展难题

### 单晶结构预测

- 与国内头部晶型研究企业深度捆绑实现晶型预测及晶型研究实验
- 协同于一体完成闭环

### 晶态材料 结构功能预测

- **药物领域：**结合头部企业现有资源和企业自身营销渠道在国内预测市场进入前三
- **其他领域：**锚定全球晶型可能机遇，与企业研发合作，实现研发入股/产品入股逻辑闭环
- **预测模型迭代，**覆盖更多晶型类别，从结构过渡至性能、功能及应用预测
- **参与制定行业标准**

### 泛晶态材料 预测能力扩展

- **药物领域：**在国内结晶药物等方向实现稳健增长
- **结晶高分子等材料：**实现结构、性能、应用预测，实现多曲线发展
- **其他领域：**成熟开展各领域项目/产品协同研发开拓市场新机会新增长

### AI For Science 助力产业升级

- 成为全球领先的AI4S引擎平台
- 着重参与各行业企业研发，打造AI研发云，驱动全球科技创新
- **探索：**从原子、分子层面预测，实现物质微观结构与宏观性能智能预测

2025

2026

2027

2030

# AI大模型结晶预测，赋能科研与产业创新

诚邀各位与我们一同探索无限可能！



团队：诺晶生科

网址：[www.noginai.com](http://www.noginai.com)

联系电话：19898807818